

# 주성분 분석과 테라헤르츠 분광학을 이용한 유해물질 검출 Hazardous Substance Detection using Factor Analysis and THz-TDS

\*최진두<sup>1</sup>, 류성윤<sup>2</sup>, 김경수<sup>2</sup>, #김수현<sup>2</sup>

\*J. Choi<sup>1</sup>, S. Y. Ryu<sup>2</sup>, K.-S. Kim, #S. Kim(soohyun@kaist.ac.kr)<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 한국과학기술원(KAIST) 전기 및 전자공학과, <sup>2</sup> 한국과학기술원(KAIST) 기계공학과

Key words : Target factor analysis, Mixture analysis, THz wave de-noising

## 1. 서론

테라헤르츠(THz) 공학기술은 현대광학에서 최근 연구가 시작된 비교적 신생분야로서, 그림 1에서 보는 바와 같이 광학(optic) 영역과 전자(electronic) 영역 사이의 0.1-10 THz 대역의 테라헤르츠파를 기반으로 한다.<sup>1,2</sup>

일반적인 광학 영역과 전자 영역과는 달리 테라헤르츠 영역은 분자 전체의 진동과 회전, 비틀림, 수소/이온결합 등 분자간 상호작용에 관련된 고유한 지문(fingerprint) 스펙트럼을 가지고 있어 NMR 분광기, 라만 분광기, 근적외선/가시광선/자외선 분광기에서 얻기 힘든 분자간 상호작용 정보를 제공한다.<sup>3,4</sup>

최근 들어 중금속, 농약, 유해가스, 화학살생 무기 등 여러 유해물질에 의한 심각한 피해가 일어나는 현 시점에서, 테라헤르츠파 고유의 특성을 이용한 광범위한 화합물의 물질 분석 및 검출은 환경 문제 및 안전 개선의 해결책으로 기대를 받고 있다.<sup>5,6</sup>

본 연구에서는 스펙트럼 정보를 혼합물의 성분 분석을 가능케 하는 Target Factor Analysis (TFA)를 기반으로 한 Reference Target Factor Analysis (RTFA)를 제안하고 특정 관심 물질에 대한 검출 방법으로서의 타당성 조사를 위해 기초 실험을 수행하였다.

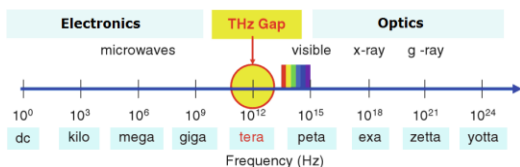


Fig. 1 Position of the THz frequency range inside the electromagnetic spectrum

## 2. Target Factor Analysis

빛이 시료를 투과하면 시료에 의해 흡수된 광량만큼 빛의 강도(intensity)는 낮아지며, 이때 흡수된 정도를 흡광도(absorbance)로 나타낸다. 흡광도는 시료의 농도와 몰흡광계수(molar absorptivity)의 곱으로 표현되며, 물질의 고유 성질인 몰흡광계수는 파장의 함수로 주어진다. 비어의 법칙에 따르면, 여러 물질이 섞여 있는 혼합물의 파장 별 흡광도는 각 구성 물질의 흡광도의 선형 합으로 나타내어진다.<sup>7</sup>

혼합물의 흡광도에 TFA를 적용하면 구성 물질의 농도 행렬을 추출할 수 있다.<sup>8</sup> 그림 2는 TFA의 주요 과정을 요약하여 보여준다.

## 3. Reference Target Factor Analysis

TFA에 의한 혼합물의 조성 분석은 각각 다른 농도 정보를 가지는 스펙트럼을 다량으로 획득해야 하므로 많은 횟수의 측정이 필요하다. 하지만 다량의 측정이 힘들거나 불가능할 때의 경우까지 고려하기 위하여 RTFA를 제안한다.

RTFA는 혼합물 내에 존재 예상 물질의 기준 흡광도 행렬을 구축한 후, 혼합물의 흡광 스펙트럼 하나를 이용하여 조성비를 분석한다.

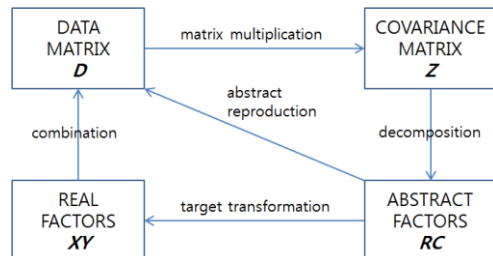


Fig. 2 Block diagram of the key steps in TFA

#### 4. 실험 과정 및 결과

쉽게 찾아볼 수 있는 펠릿 형태의 벤조산, 프탈산, 아스피린, 살리실산, 실리콘 기관과 강한 독성을 가지는 브롬화탈륨과 살균제 농약의 일종인 카프탄(captan)의 테라헤르츠 투과도<sup>9</sup>를 이용하여 RTFA 실험을 수행하였다.

RTFA 가 사용하는 혼합물 흡광 스펙트럼의 개수는 하나뿐이기 때문에 가능한 경우의 수는 세가지가 있다. 아래의 경우에 대해 성분비 분석과 이를 이용한 흡광도 복원을 수행하였다.

1. 기준 스펙트럼의 수 = 구성 물질의 수
2. 기준 스펙트럼의 수 > 구성 물질의 수
3. 기준 스펙트럼의 수 < 구성 물질의 수

표 1 은 위의 경우 1, 2 에 대해 계산한 혼합물 성분비의 오차율을 나타낸다.

한편, 테라헤르츠 시간 영역 분광기에서 얻은 펄스는 각종 잡음이 가해져 있고 이는 주파수 영역의 스펙트럼에도 영향을 미친다. RTFA 는 작은 고유치를 가지는 고유벡터를 소거하므로 그림 3 에서 볼 수 있듯이, 잡음의 영향을 감소시키는 기능도 함께 지니고 있다.

Table 1 Component concentration and error ratio

Case	1		2	
아스피린	21.09%	(0.07%)	0%	-
벤조산	9.42%	(0.51%)	21.09%	(0.01%)
카프탄	30.42%	(0.15%)	40.42%	(0.05%)
살리실산	10.92%	(0.68%)	0%	-
실리콘	10.42%	(2.00%)	28.76%	(2.01%)
브롬화탈륨	17.73%	(0.01%)	9.73%	(0.04%)

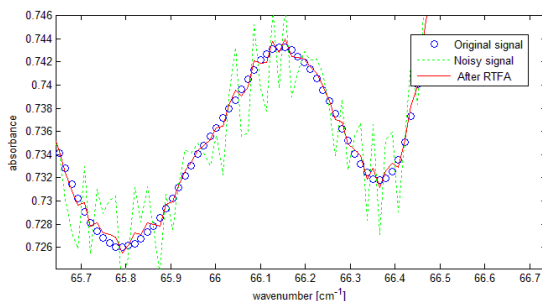


Fig. 3 Noise reduction via RTFA

#### 5. 결론

본 연구에서는 TFA 의 한계점을 보완한 RTFA 를 새로이 제안하였으며, 유해물질 등 특정 관심 물질에 대한 검출 방법으로서의 타당성 조사를 위해 기초 실험을 수행하였다. 단 한번의 측정 스펙트럼을 이용하여 최대 2% 내외의 오차율을 가지는 조성도 분석 결과를 도출하였으며, 주성분 분석으로 인한 신호 대 잡음비도 향상되는 것을 확인하였다.

향후에는 스펙트럼 획득 과정에서 발생할 수 있는 여러 변수들을 고려한 추가적 알고리즘 개발이 필요할 것으로 생각된다.

#### 참고문헌

1. Ferguson, B., and Zhang, X.-C., "Materials for Terahertz Science and Technology," *Nature Materials*, **1**, 26-33, 2002.
2. Withayachumnankul, W. et al., "T-Ray Sensing and Imaging," *Proceeding of the IEEE*, **95**, 1528-1558, 2007.
3. Walther, M. et al., "Chemical Sensing and Imaging with Pulsed Terahertz Radiation," *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, **397**, 1009-1017, 2010.
4. Plusquellic, D.F. et al., "Applications of Terahertz Spectroscopy in Biosystems," *ChemPhysChem*, **8**, 2412-2431, 2007.
5. Federici, J. F. et al., "THz Imaging and Sensing for Security Applications – Explosives, Weapons and Drugs," *Semiconductor Science and Technology*, **20**, S266-S280, 2005.
6. Davies, A. G. et al., "Terahertz Spectroscopy of Explosives and Drugs," *Materials Today*, **11**, 18-26, 2008.
7. Boily, J.-F. et al., "Extraction of Chemical Speciation and Molar Absorption Coefficients with Well-Posed Solutions of Beer's Law," *Journal of Solution Chemistry*, **35**, 917-926, 2006.
8. Malinowski, E. R., "Factor Analysis in Chemistry," 3<sup>rd</sup> Ed., Wiley-Interscience, 2002.
9. NICT THz Project, RIKEN Tera-Photonics Laboratory, and Tohoku University, "THz database," *Terahertz Project*, 2007.